

等离子体粒子模拟技术引起的对于色散关系的偏离及对孤立子模拟的影响

王 闯

(应用物理系)

摘 要 本文用解析分析的方法分析了等离子体粒子模拟中的有限大小粒子、电荷近网格分配和时间差分方法引起的相对于等离子体静电波色散关系的偏离,导出了修正后的色散关系。文中设计了等离子体粒子模拟的计算机模拟实验方案,验证了有限大小粒子和时间差分方法引起的对于色散关系的偏离;介绍了用不同大小粒子进行孤立子现象的等离子体模拟,结果表明,粒子的大小不同可产生相反的结果。

关键词 等离子体粒子模拟,色散关系,孤立子

分类号 P354. 4

等离子体粒子模拟^[1]是一项新的研究等离子体物理的技术。它用大型计算机跟踪组成等离子体的大量带电粒子的运动,再对这些带电粒子的运动进行统计平均而得到等离子体的宏观运动。它既能研究、观察等离子体的宏观运动,又能研究、观测其中每个粒子的运动。传统的等离子体流体方程是等离子体宏观物理量的运动方程。它略去了单个粒子的特殊运动。等离子体的动力学方程原则上可以描述不同速度群的运动,但它在相空间作了统计平均、是光滑化了的结果,没有考虑统计起伏的影响。因而从这意义上讲,等离子体粒子模拟技术考虑等离子体运动因素最齐全,最能准确反映实际等离子体的运动。在一定意义上它可以代替实验的功能;从模拟的结果得到初步的理论构思;又以模拟对理论的结果作初步的验证。

但是粒子模拟技术本身在建立的时候,其方法、技巧的应用引入了一些非物理的误差,它们并不反映实际等离子体的运动,但其结果却体现在模拟结果之中,在一定条件下影响到等离子体的宏观性质表述。因而,为使粒子模拟结果准确、可靠,首先要从原理上搞清,粒子模拟技术中所用的技巧、近似对结果影响的规律。这些方法和技巧中,最为重要的因素是时间差分、有限大小粒子和带电粒子的近网格分配。文献[2][3][4]分别对这些因素进行分析,从理论上得到它们对粒子模拟结果的影响。本文分析了这几个因素对粒子模拟的影响,从理论上得到了它们对色散关系的修正,并设计了模拟实验,验

* 国家自然科学基金资助项目

** 1990年9月28日收稿

证了这些修正。特别是举出了非均匀等离子体中朗缪尔孤立子的粒子模拟这一实例，说明有限大小粒子的尺寸最终影响了物理过程的定性性质描述。

1 修正的色散关系

粒子模拟技术所采用的近似有：时间差分、有限大小粒子、快速福里哀变换 (FFT)、荷电粒子的近网格分配。其中 FFT 由于采用了高精度的变换程序，其对色散关系的影响很小，可以忽略。以下逐个考虑这些近似在色散关系的导出中所作的修正。

因计算机的容量和速度限制，所模拟的带电粒子数要远远小于实际等离子体的粒子数，这样，所解出的场起伏大大增加，增加了粒子之间的碰撞作用，为克服这一非物理因素，引入了有限大小粒子的概念，即把每个带电粒子看作有一定形状和大小、相互之间能自由穿透的带电粒子。如果设 ρ_p^0 为粒子中心点的数密度， $S(x-x_0)$ 为中心点在 x_0 处粒子的形状因子，则粒子电荷的空间密度为

$$\rho_p^0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(x-x_0)\rho_p^0(x_0)dx_0 \quad (1)$$

变换到福里哀空间，有

$$\rho_{pk}^0 = S(k_n)\rho_{pk}^0 \quad (2)$$

粒子在空间各处是随机分布的。为了数值求解麦克斯韦方程，必须把粒子在空间的分布变成电荷（或电流）在空间网格点上的分布。因而要把每个带电粒子的电荷分配到最近的几个网格点上。其分配的方式为对最近网格点的电偶极守恒。即每个电荷对最近网格分电

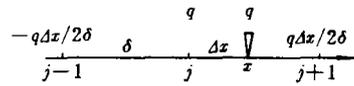


图 1

荷 q ，对近端网格分 $q\Delta x/2\delta$ ，对远端网格分 $-q\Delta x/2\delta$ （见图 1）。这样，它分配的总电荷仍为 q ，而且对最近网格 j 的电偶极矩 $q\Delta x$ 保持不变。

由此电荷在空间网格点的分配为

$$\begin{aligned} \rho_p(j) = \frac{1}{\delta} \left[\int_{(j-\frac{1}{2})\delta}^{(j+\frac{1}{2})\delta} \rho_p^0(x)dx + \int_{(j-\frac{3}{2})\delta}^{(j-\frac{1}{2})\delta} \frac{x - (j-1)\delta}{2\delta} \rho_p^0(x)dx \right. \\ \left. + \int_{(j+\frac{1}{2})\delta}^{(j+\frac{3}{2})\delta} \frac{(j+1)\delta - x}{2\delta} \rho_p^0(x)dx \right] \quad (3) \end{aligned}$$

将(3)式变换到 k 空间，代入 $\rho_p^0(x)$ 的福里哀表示，对 x 积分，并代入(2)式即得网格电荷密度的 k 空间表达式，即

$$\rho_{pk} = \rho_{pk}^0 S(k_n)\sigma \quad (4)$$

其中：

$$\sigma = \text{sinC}\left(\frac{k\Delta x}{2\pi}\right) + \text{sinC}\left(\frac{k\Delta x}{\pi}\right) \left[\cos\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - \text{sinC}\left(\frac{k\Delta x}{2\pi}\right) \right] \quad (5)$$

而 $\text{sinC}(x) = \text{sin}(\pi x)/\pi x$ ，由此得出中心点密度分布为 $\rho_p^0(x)$ 的有限粒子气体产生静电场在 k 空间表达式为

$$E_{k_n} = \frac{4\pi}{ik_n} \rho_{pk} = \frac{4\pi}{ik_n} \rho_{pk}^0 S(k_n)\sigma \quad (6)$$

如果设模拟的等离子体是一维、静电、无外场热等离子体，粒子为有限大小，粒子运动以时间差分形式运动，则其动力学方程的时间差分表达方式可表为

$$\frac{f(t + \Delta t/2) - f(t - \Delta t/2)}{\Delta t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{n_0 e}{m} \left\{ \int S(x - x') E(x') dx \right\} \frac{\partial \hat{f}_0}{\partial v} \quad (7)$$

其 \hat{f}_0 为平衡态归一化分布函数， f 为其一级小量。对此式作福里哀变换，即可得：

$$f(\omega, k) = \frac{in_0 e S(k)}{mk} E(\omega, k) \frac{\partial \hat{f}_0 / \partial v}{v - \omega_s / k} \quad (8)$$

其中： $\omega_s = \omega \text{sinc}(\omega \Delta t / 2\pi)$ 。注意到：

$$\rho_r^0(\omega, k) = e \int f(\omega, k, v) dv \quad (9)$$

将(8)式代入(9)式，并代入连续谱形式的(6)式，即可得修改的静电波粒子模拟等离子体色散关系的动力学表达式，即

$$1 = \frac{\omega_p^2 S^2(k) \sigma}{k^2} \int \frac{\partial \hat{f}_0 / \partial v}{v - \omega_s / k} dv \quad (10)$$

积分沿朗道围道。此式的 $S(k)$ ， σ 和 ω_s 分别体现了有限大小粒子，粒子偶极守恒的近网格分配和时间差分对等离子体色散关系的修正。当有限大小的粒子尺寸变为无穷小，粒子趋于点粒子；空间和时间的网格长度 Δx 和 Δt 趋于无穷小， $S(k)$ 和 σ 趋于 1，而 ω_s 趋于 ω 。公式(10)转变为等离子体静电波的色散关系。

2 计算机模拟实验验证修正的色散关系

公式(10)所表达的数值模拟所引入的非物理因素对等离子体色散关系的影响可以在计算机模拟实验中得到验证。我们在一维静电波粒子模拟程序上设计了实验计算方案验证有限大小粒子和时间差分对色散关系的影响。具体方案是这样的：一维静电波空间坐标为 64；周期边界条件，其内电子、离子数各为 1250 个。因只验证电子朗缪尔波的色散关系，离子可以不动。1250 个离子在初始时空间均匀分布并在过程中保持不动。电子的初始位置与离子重合，但每个粒子有初速度，其速度分布满足随机的麦克斯韦分布。电子的热运动速度为 $1\delta\omega_p$ ，其中 δ 为空间网格长度， ω_p 为电子等离子体频率。每个带电粒子为有限大小，其形状为高斯函数形式。初始时电子、离子重合，系统电场能为零，但热运动总动能不为零。经过一段时间的运行，热动能和电场能不断交换，最后趋于平衡。由于带电粒子的无规运动，电场能量分布在各个不同频率范围内，由于等离子体的谐振特性，其主要电场能量集中在静电波模之中。具体来说，计算的电场能谱峰值是在满足等离子体静电模色散关系的位置，利用这一点即可求粒子模拟静电模的色散关系。具体作法是：在经过一段时间的能量交换以后，记录每一时刻的对应不同波矢 k 的电场值。最后对每个 k 的电场—时间曲线进行频谱分析，求出每个 k 对应电场频谱峰值处的 ω 值。绘出 $k \sim \omega$ 曲线图即为粒子模拟计算机实验所测得的静电模的色散关系式。

为了验证有限粒子尺寸大小对色散关系的影响，我们采用上述方案。粒子的形状为高斯型：

$$S(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}a} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}} \quad (11)$$

则其在 k 空间的表达式为 $S(k) = \exp(-k^2 a^2/2)$, 其中 a 表示有限粒子的大小。试验中采用 a 分别等于 0.5, 1.0, 1.5 δ (δ 为网格长度), 时间步长 $\Delta t = 0.2\omega_p^{-1}$, 试验结果所得色散关系如图 2 所示。由图可见, 当 $k\lambda_D \rightarrow 0$ 时, 几条色散关系趋于一致, 而在 $k\lambda_D$ 稍大并远小于 1 时, 色散关系不同。粒子尺寸越大, 色散曲线越趋向平坦。关于这一点, 可以由 (10) 式的结果得到理论的解释。如果考虑一维静电模热等离子体, 相速度远大于热速度, 即 $k\lambda_D \ll 1$ 时, 只看色散关系, 即只留 (10) 式的实部, 即得:

$$S^2(k)\sigma\omega_p^2 + \frac{3k^2V_a^2S^2(k)\sigma\omega_p^2}{\omega^2} = \omega^2 \quad (12)$$

对于网格分为 64 的空间, 对一般的 k 值 σ 都是十分接近于 1 的值。此外对于取 $\Delta t = 0.2\omega_p^{-1}\sin C\omega\Delta t$ 值十分接近 1, 则 $\omega_s \rightarrow \omega$, 该式左端第二项是个小量, 由此式可以化简为

$$\omega^2 = S^2(k)\omega_p^2 + 3k^2V_a^2 \quad (13)$$

以高斯型粒子形状因子的 k 空间表达式代入, 近似可得:

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \left(3 - \frac{a^2}{\lambda_D^2}\right)k^2V_a^2 \quad (14)$$

由 (14) 式可知, 当 $k\lambda_D \ll 1$ 时, 粒子尺寸 a 越大, 色散曲线越向外张, 越平坦。而 $k\lambda_D$ 值越小, 式右端第二项所占比例越小, 因而 a 对色散曲线影响的效应变小, 几条曲线趋于一致, 与模拟实验的结果定性一致。此外, 由此式还可以看到: 有限大小粒子等离子体的尺寸不能太大, 当 a 值大于 $\sqrt{3}\lambda_D$ 时, 右端第二项即变为负值, 这时色散曲线不是向上跳, 而是向下弯。原来的禁带变成通带, 原来的通带变成禁带。介质性质发生根本变化, 影响到模拟实验结果可靠性, 必须加以注意。

为验证时间步长对色散关系的影响, 按排同样的模拟实验, 取 $a = 1.0\delta$, 而时间步长取 $\Delta t = 0.4\omega_p^{-1}$, 所得色散关系如图 3 中 “ Δ ” 和 “ \times ” 点所示, 色散关系呈两个分枝。 ω 近似等于 ω_p 的分枝与实际等离子体的色散关系相类似, 而 ω 等于 14 ω_p 左右的分枝则是实际等离子体色散关系所不存在的。这一点亦可以从 (10) 式所导出的理论来解释。除了因取 $\Delta t = 0.4$ 太大, ω_s 中的 $\sin C\omega\Delta t$ 不能作近似外, 可对 (12) 式作类似的近似, 即可得:

$$1 + \left(3 - \frac{a^2}{\lambda_D^2}\right)k^2\lambda_D^2 = \frac{4}{\omega_p^2\Delta t^2}\sin^2 \frac{\omega\Delta t}{2} \quad (15)$$

求解此式 $\omega \sim k$ 色散关系, 可得出的色散关系如图 3 中实线曲线所示。得出两个分枝, 与模

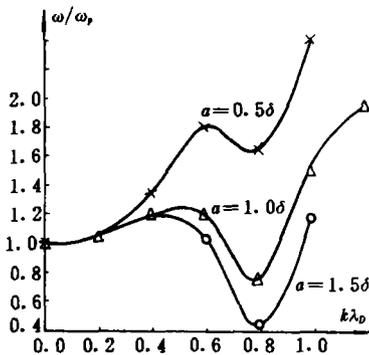


图 2 不同大小粒子对色散关系的影响

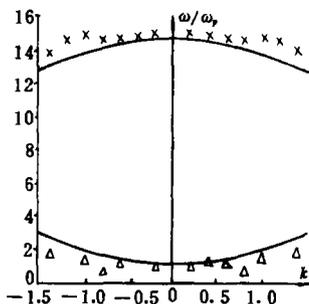


图 3 时间步长对色散关系的影响

拟实验结果符合较好。由式(15)可见：当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时，式子变成(14)式，色散曲线由两个分枝退化为一个分枝。这说明得出的高频率的分枝是由于模拟过程中划分时间差分而引起的，是非物理的伪模。如果在模拟实验中激发起这种伪模，就会影响模拟结果，得不到真实的物理现象。由式(15)可见，伪模的频率与时间步长有关系，步长越大，伪模主频越低，越容易受到低频真实等离子体振荡的激发。因而在静电波模拟中要注意时间步长的选取，以使伪模的主频足够高，远离实际等离子体振荡频率，以避免激发非物理的伪振荡。

3 粒子大小对孤立子模拟结果的影响

粒子大小，时间差分、电荷近网格分配这些模拟的技巧是模拟所必需的，但这些非物理因素影响模拟结果，一般情况下，在量上有一定的影响，在特殊情况下，从基本性质上影响模拟的结果。在模拟过程中必需考虑这一因素。比较明显的例子就是一维静电朗缪尔孤立子的模拟。

非均匀等离子体中的静电朗缪尔孤立子是激光等离子体相互作用和电磁波与电离层相互作用过程中的重要物理现象。它的基本物理过程是这样的：密度线性化非均匀的等离子体中，由低密度区入射一静电朗缪尔波。这波在等离子体的临界点——等离子体频率与入射静电波频率相等点处被反射。这是因为在临界点前的低密度区，波频率高于等离子体频率，静电波可以传播。而在临界点后的高密度区，波频率低于等离子体频率，波截止。在低密度区传播的波，越接近临界点，其波频率和等离子体频率之差越小，故所激发的静电波振幅越大。而在临界点，静电波频率与等离子体固有频率发生共振，这时产生的电场幅值最大。而这大的振荡峰值所产生的有质动力把等离子体推开，产生密度空穴，构成了完备的孤立子。已有的研究工作^[5]是以流体近似的方法数值模拟这一过程，但流体近似不能描述单个粒子与波的相互作用，所以必须用粒子模拟的方法。

设计模拟朗缪尔孤立子的方案是这样的：空间网格 64，边界条件非周期性的，平均每个网格各模拟 40 个电子和离子。粒子密度线性非均匀分布，可表示为：

$$n(x) = n_0 \left(1 + \frac{x - x_0}{L} \right)$$

其中 x_0 为临界点， n_0 为临界密度， L 为线性非均匀特征长度。取 L

$= 36\delta$ ，电子热速度 $V_{te} = 0.2\delta\omega$ ，粒子大小取 $a = 1\delta$ 。静电振荡是以“电容模型”加进去的，即在非周期边界条件中设高密度一端边界电位保持为零，而低密度一端边界电位以一定幅值随时间以 ω_0 作周期振动。两个边界及其内的等离子体就好象一个平板电容器。模拟结果的密度分布和电场幅值分别如图 4a 和图 4b 所示。图中可见，确实在临界点附近出现了电子密度的凹陷和电场振幅的峰值。但明显不合理的是：静电波的传播是在高密度区，而在等离子体频率小于波频率的通带却反而不出现静电波的振荡，这违背了静电

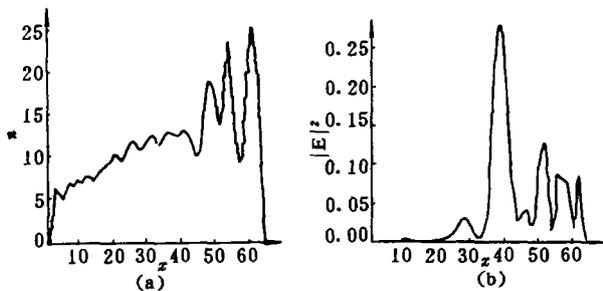


图 4 $\lambda_0 = 0.2\delta$ 时孤立子的密度和电场幅度图

波等离子体的基本特性。为解释这一现象，可通过分析粒子模拟的条件。由于一般孤立子的大小有几十个 λ_D ，而计算机容量关系模拟只取 64 个网格，为使空间能容纳下孤立子，要求缩小 λ_D 的值，因而取 $V_{the}=0.2$ ，这样对于临界点处的 $\lambda_D=0.2\delta$ 。而粒子大小 $a=1\delta$ ，此值放入(14)式的色散关系中，公式右端第二项变为负值，亦即 $a > \sqrt{3} \lambda_D$ ，色散曲线向下弯，原来的通带变为禁带，原来的禁带变通带，由此引起静电振荡产生在低密度区而不是产生在高密度区。可见，粒子模拟结果在基本图象上的不合理是由于引入了有限大小粒子产生的非物理效应引起的。分析了原因后，对模拟的参数进行调整，空间网格点改为 128，特征长度改为 72δ ，粒子大小改为 $a=0.7\delta$ ，而电子热速度改为 $V_{the}=0.55\delta_{up}$ 。由此可保证(14)式中 $(3-a^2/\lambda_D^2) > 0$ ，保证了色散关系的基本性质不变。其模拟结果的电子密度剖面

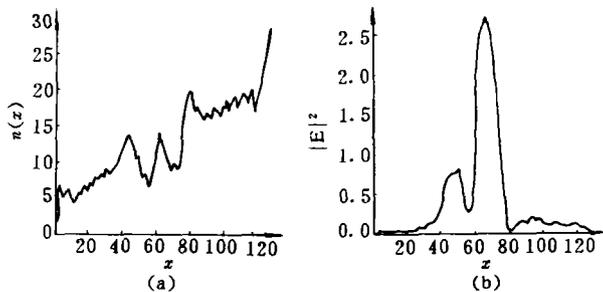


图 5 $\lambda_D=0.55$ 时孤立子密度和电场幅值图

如图 5a 和图 5b 所示。静电振荡及其密度凹陷产生在临界点和临界点前的低密度区。物理上是合理的。这一模拟结果的相空间图如图 6 所示。由图可见在临界点和临界点前区域电子速度发生大的变动，而且临界点和前一振波的位相相反，这一强电场的振荡在每一个周期中向正反两个方向各打出一束高能电子，图中对于同一速度相邻两束电子的距离刚好是这一速度在一个周期里所走的距离，因而这两束电子是相邻两个周期向同一方向发出的电子。这些高能电子即是激光等离子体中的超热电子，它们对靶材料的预加热成为激光聚变研究的重要困难之一。这一现象从流体近似的方法是得不出来的，只有用粒子模拟的方法，才能对其仔细研究。

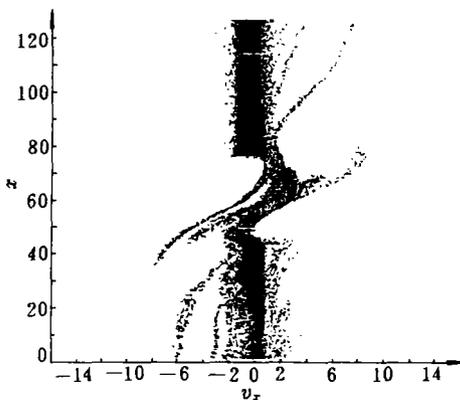


图 6 孤立子电场产生高能电子相空间图

由此可见，粒子模拟中的一些技术，像有限大小粒子、电荷近网格分配、时间差分，会对模拟结果有影响，一般是在量上的偏差。但是在一定的条件下，也会产生质的错误。这是在作粒子模拟时必须注意和考虑的。

参 考 文 献

- [1] Dawson J M. Partical Simulation of Plasmas. Rev. of Modern Phy, 1983, 55(2): 403
- [2] Okuda H and Birdsall C K. Collision in Plasma of Finite—Size Particales. Phys. of Fluid, 1976, 13(8): 2123
- [3] Okuda H. Nonphysical Noise and Instability in Plasma Simulation due to a Spatial Grid. Journal of Computational Phys, 1972, (10): 475—486
- [4] 刘成海, 王闽. 等离子体粒子模拟的静电波谱响应特性. 计算物理, 1984, 1(2): 200
- [5] Morales G J and Lee Y C. Electrostatic Caviton in Nonuniform Plasma. The Phys. of Fluid, 1977, 20(7): 1135

The Effect of Plasma Particle Simulation on Dispersion Relation and Soliton Motion

Wang Min

(Department of Applied Physics)

Abstract

A theoretical model is made to analyse the effects of finite—size particle, charge nearest grid sharing and time difference on the electrostatic dispersion relation of plasma. A modified dispersion relation is derived. The computer experimental scheme to simulate the plasma particle is designed. The simulation result shows the effects of finite—size particle and time difference on dispersion relation. Finally, completely diffrent simulation results of plasma soliton with different particle size are presented. It indicates that these effects may change the basic physical phenomena of the simulated results in some circumstances.

Key words plasma particle simulation, dispersion relation, soliton